



TAMPEREEN
AMMATTIKORKEAKOULU

KÄYTTÖOHJEEN JA OPINTOMATERIAALIN PÄIVITTÄMINEN SIMULOINTIOHJELMALLE

Riku Laitinen

Opinnäytetyö
Kesäkuu 2017
Biotuote- ja Prosessiteknikka
Prosessiteknikka



TIIVISTELMÄ

Tampereen ammattikorkeakoulu
Biotuote- ja Prosessitekniikka
Prosessitekniikka

RIKU LAITINEN

Käyttöohjeen ja opintomateriaalin päivittäminen simulointiohjelmalle

Opinnäytetyö 29 sivua.
Kesäkuu 2017

Opinnäytetyön tarkoituksena oli tuottaa suomenkielinen käyttöohje ja päivittää opintomateriaalia ChemCad-simulointiohjelmalle. Simulointiohjelma on käytössä Tampereen ammattikorkeakoulun Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen- opintojaksolla. Tähän asti simulointiohjelman käyttöohje on ollut englanniksi ja se on ollut todella pitkä. Tavoitteena oli saada tiivis käyttöohje, jota voitaisiin hyödyntää opintojaksolla. Opintomateriaali tehtiin aikaisempien opintojaksojen aikana esiintyvien prosessien pohjalta.

Käyttöohje soveltuu ohjelman perustoimintojen käyttämiseen, ja sen avulla pystytään tekemään simulointiohjelmalle tehtyt harjoitukset. Käyttöohjeen pituus pysyi lyhyenä ja siihen saatiin sisällettyä kaikki tarvittava. Harjoitukset ovat monipuolisia, jotta simulointiohjelmasta oppisi mahdollisimman paljon niiden avulla.

Opinnäytetyön tavoitteet eivät täyttyneet täysin, ja tämän takia opintojaksolla käytettäviä tehtäviä voitaisiin kehittää enemmän. Niiden tuottaminen oli haastavaa, ja aikataulullisista syistä niihin paneutuminen jäi vähäiseksi.

ABSTRACT

Tampereen ammattikorkeakoulu
Tampere University of Applied Sciences
Degree Programme in Bio Product and Process technology
Option of Process technology

RIKU LAITINEN

Updating Instruction Manual and Study Material for Simulation Software

Bachelor's thesis 29 pages.

June 2017

The target of the thesis was to produce translated instruction manual into Finnish and update the study material for ChemCad-simulation software. Simulation software is used in Tampere University of Applied Sciences in Plant design and process modelling-course. So far there have been instruction manual in English and it has been very long. The Aim was to create a compact manual, which can be used in the course. The study materials were developed from the processes used in the previous courses.

The instruction manual is suitable for using the basic functions of the program, and allows you to perform the exercises which are made for the simulation software. The length of the manual was kept short and all the necessary information can be found. The exercises are different from another to maximize the use of the software.

The goals of the thesis were not completely fulfilled, and so these exercises could be further developed. Creating these exercises was challenging, and I wish I would have had more time to deepen my knowledge about the creating simulation exercises.

Key words: Simulation software, instruction manual

SISÄLLYS

1	JOHDANTO.....	5
2	CHEMCAD-SIMULOINTIOHJELMA.....	6
3	TEHDASSUUNNITTELU JA PROSESSIEN MALLINTAMINEN OPINTOJAKSO.....	7
3.1	Opintojakso.....	7
3.2	ChemCad-simulointiohjelman käyttö opintojaksolla	7
4	KÄYTTÖOHJE.....	8
4.1	Käyttöohje.....	8
5	CHEMCAD HARJOITUKSIA	15
5.1	Kolonni	15
5.2	Reaktori.....	17
5.3	Lämmönsiirrin	18
5.4	Prosessin simulointi harjoitus	19
5.5	DataBank	21
6	TULOSTEN KÄSITTELY	22
6.1	Kolonni	22
6.2	Reaktori.....	25
6.3	Lämmönsiirrin	26
6.4	Prosessin simulointi harjoitus	27
7	YHTEENVETO	28
	LÄHTEET.....	29

1 JOHDANTO

Opinnäytetyö tehtiin Tampereen Ammattikorkeakoululle, Tehdassuunnittelun ja prosessien mallintaminen- opintojakson tueksi. Työn tarkoituksena oli päivittää käyttöohje ja opintomateriaalia ChemCad-simulointiohjelmalle. ChemCad on Chemstations Inc:in valmistama prosessinsimulointiohjelmisto, jonka avulla voidaan mallintaa prosesseja tietokoneen avulla.

Työn tavoitteena oli saada aikaan tiivis ja helppolukuinen käyttöohje simulointiohjelman peruskäyttöä varten. Simulointiohjelma on hyvin laaja, ja opintojaksolla siihen käytettävä aika lyhyt. Kevennetyn, perustoiminnot sisältävän käyttöohjeen avulla oppiminen on helpompaa, ja ohjelmasta tulee helpommin käsiteltävä kokonaisuus. Tämän lisäksi tavoitteena oli päivittää simulointiohjelmalle eri prosesseja sisältäviä harjoituksia, jotka pysyisi suorittamaan uuden käyttöohjeen avulla.

Suoritin Tehdassuunnittelun ja prosessien mallintaminen- opintojakson viimeisen opiskeluvuoteni aikana, joten olin päässyt tutustumaan simulointiohjelmaan aikaisemmin. Tämä oli mielestäni hyvä asia, koska käyttöohje tuli suurelta osin tehtyä käyttökokemuksen ja simulointiohjelman laajan englanninkielisen opetusmateriaalin pohjalta. Pidin opinnäytetyön aiheesta ja asetelmasta, koska tässä pääsin kokemaan, kuinka käyttäjien/opiskelijoiden materiaalit voivat syntyä.

2 CHEMCAD-SIMULOINTIOHJELMA

ChemCad on Chemsations Inc. valmistama simulointiohjelma. Se sai alkunsa Houstonin yliopistossa, jossa ChemCad:in edeltäjä CHESS (Chemical Engineering Simulation System) luotiin vuonna 1968. Ohjelmaa kehitettiin eteenpäin ja vuonna 1985 se sai nimekseen ChemCad. Tästä kolmen vuoden päästä, vuonna 1988 Chemstations perustetaan ja se ostaa ChemCad:in oikeudet.

ChemCad-simulointiohjelmisto on maailmanlaajuisessa käytössä ja sillä on kattava käyttäjäkunta. Ohjelmaa käyttävät esimerkiksi kemiantekniikan yritykset, insinööritoimistot ja koulut. Ohjelmalla voidaan ratkaista prosessin sisäisiä pieniä ongelmia tai suunnitella jopa kokonaisia tuotantolinjoja. Sen monipuoliset ominaisuudet ja muokattavuus takaavat sen käytettävyyden työelämässä sekä opetuksessa.

Simulointiohjelmistoja löytyy markkinoilta todella paljon, joten ChemCad-simulointiohjelmalle löytyy kilpailijoita. Vastaavia simulointiohjelmistoja ovat esimerkiksi Aspen Plus, DWSIM ja Pro/II. Ohjelmistoilla pystytään pääasiassa tekemään samat asiat, vaikka niiden välillä löytyy eroja. (Chemstations, Products)

3 TEHDASSUUNNITTELU JA PROSESSIEN MALLINTAMINEN OPINTO-JAKSO

Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen on Biotuote- ja prosessitekniikan opiskelijoiden vapaasti valittava opintojakso, joka kuuluu Soveltava ammatillinen osaaminen kokonaisuuteen.

3.1 Opintojakso

Opintojaksolla käydään läpi kemiantekniikan tuotantolaitoksen suunnitteluprosessi, prosessisuunnittelua, turvallisuuskäsitteitä, mitoitustehtäviä ja simulointiharjoituksia. Opintojakson jälkeen opiskelija osaa prosessitekniikan tuotantolaitoksen suunnitteluprosessin pääpiirteet, ja tietää esimiestehtävät, oikeudet ja velvollisuudet, sekä Suomen työlainsäädännön keskeiset lait ja sopimukset. Opiskelija myös osaa muodostaa perusprosessien malleja ja suorittaa yleisempien laitteiden prosessitekniikan mitoituksen. Opintojaksolla käydään läpi myös suunnitteluprosessin taloudellisuuteen liittyviä laskuja, ja perehdytään ChemCad-simulointiohjelman käyttöön. (TAMK, Opetussuunnitelmat)

3.2 ChemCad-simulointiohjelman käyttö opintojaksolla

ChemCad-simulointiohjelman käyttäminen on vain yksi osa opintojaksoa, ja se koostuu pääasiassa ohjelmaan tutustumisesta. Tämä kuitenkin tehdään erilaisten harjoitusten avulla, jonka pohjalta on mahdollista jatkaa ohjelmaan itsenäisesti tutustumista. ChemCad-simulointiohjelmalla tehtävät harjoitukset ovat erilaisten prosessien mallintamista ja niiden lomassa syntyvien ongelmien ratkaisemista. Näiden harjoitusten avulla opiskelija pääsee kokemaan, mitä prosesseissa tulee ottaa huomioon. Mallinnusharjoitusten lisäksi simulointiohjelmalla on tärkeää osata käyttää ohjelman kirjastoa, eli Data-Bank:ia. Tämän takia simulointiohjelmalle päivitettiin harjoituksia, missä opitaan hakemaan tietoa kirjastosta ja soveltamaan sitä.

4 KÄYTTÖOHJE

ChemCad-simulointiohjelma sisältää monia kymmeniä sivuja pitkän englanninkielisen opetusmateriaalin, jota käytettiin pohjana suomenkieliselle käyttöohjeelle.

4.1 Käyttöohje

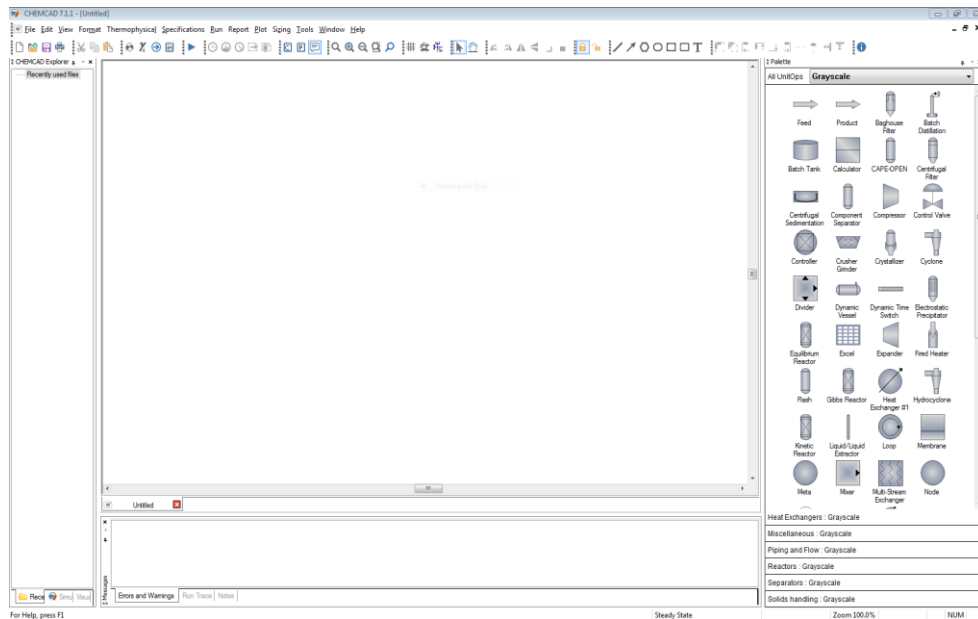
Ohjelmaa voidaan käyttää ja soveltaa monella eri tavalla, mutta perussimulaation luominen voidaan jakaa seuraaviin vaiheisiin.

Simulaation rakentaminen ja käyttö:

1. Uuden simuloinnin aloitus
2. Suunnitteluyksiköiden määrittäminen
3. Kemiallisten aineosien valitseminen
4. K-arvon ja entalpia vaihtoehtojen valinta prosessille
5. Prosessikaavion piirtäminen, virtausten ja yksikköoperaatioiden avulla
6. Prosessin syötevirtojen määrittäminen
7. Yksikköoperaatioiden teknisten tietojen lisääminen
8. Simulaation ajaminen
9. Tulosten tarkastelu

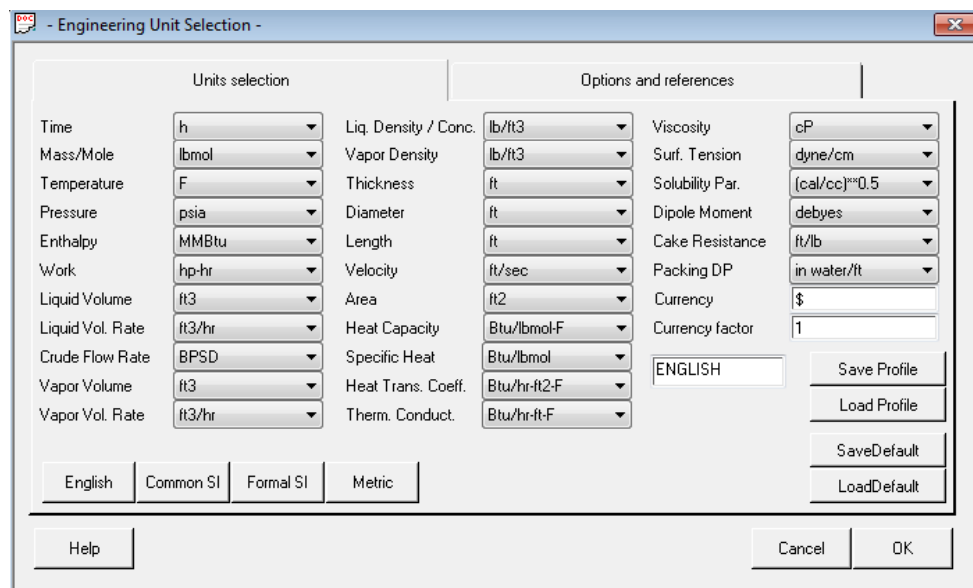
(Chemstations, User Guide 6 2012, 132-133)

Ohjelman käynnistyttyä tietokoneen ruudulle aukeaa aloitusnäyttö (kuviossa 1.), johon simuloinnin rakentaminen aloitetaan. Uuden simuloinnin luominen aloitetaan puhtaalla aloitusnäytöllä, joka saadaan valikosta **File > New**.



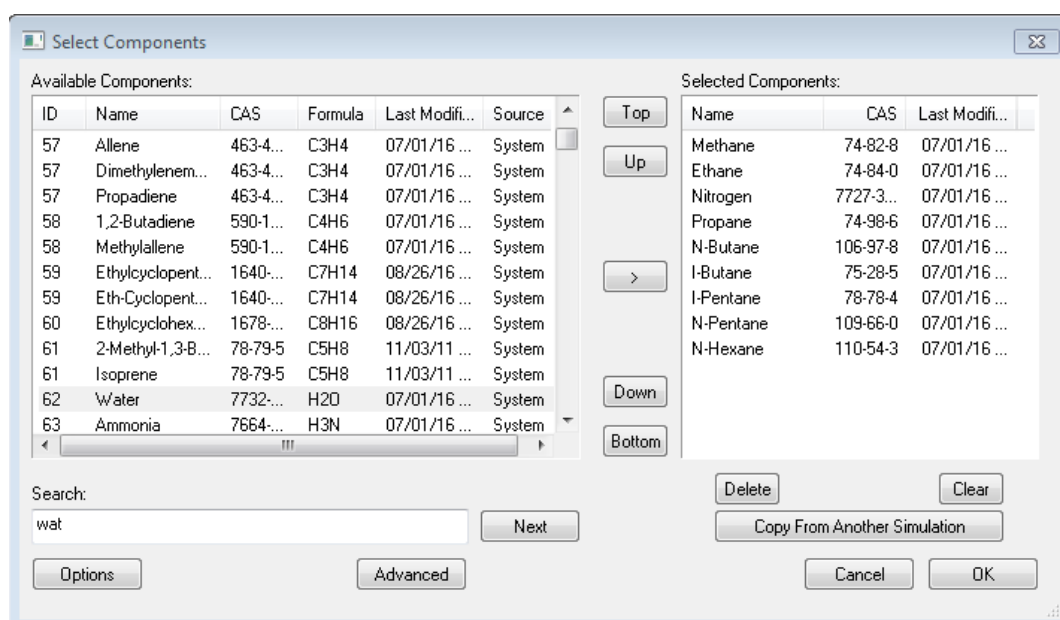
KUVIO 1. Simulointiohjelman aloitusnäyttö

Suunnitteluprosessissa käytettävien suureiden yksiköt valitaan **Format > Engineering Units**. Tämän jälkeen näytölle aukeaa valikko (kuvio 1.), mistä voi valita simuloinnissa käytettävät yksiköt. Valitsemalla **Common SI** kaikki yksiköt muuttuvat kansainvälisten SI-yksiköiden mukaiseksi. (Chemstations, User Guide 6 2012, 133)



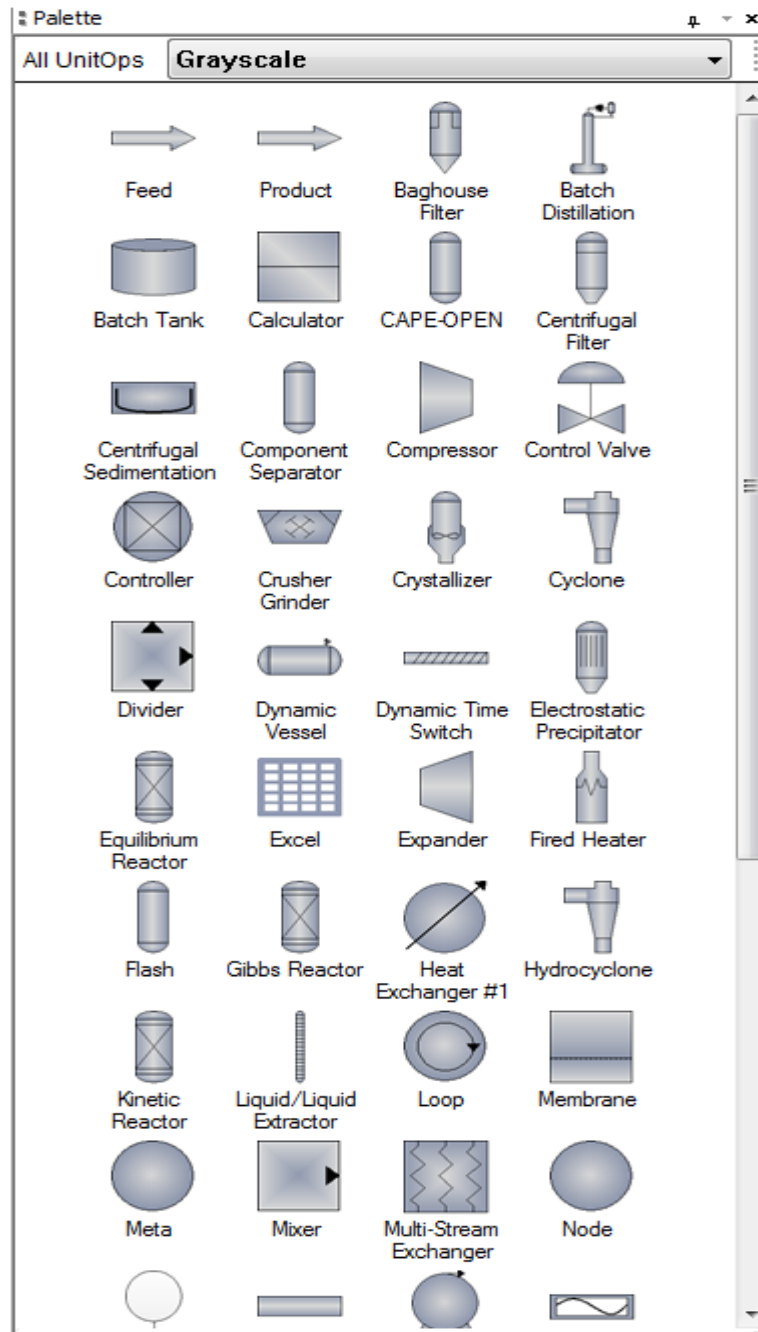
KUVIO 2. Suunnitteluyksiköiden määrittäminen

Simulointitehtävässä kulloinkin käytettävien kemiallisten komponenttien valinnan voi tehdä valikossa **Thermophysical > Select Components**. Tämän jälkeen näytölle aukeaa valikko (kuvio 2.), minkä avulla voidaan hakea haluttuja komponentteja, ja lisätä ne käytettäviksi. Haku tapahtuu syöttämällä numeroita tai kirjaimia hakukenttään, minkä pohjalta ohjelma hakee komponentteja simulointiohjelman kirjastosta. Simulointiohjelma hakee komponentteja kemiallisen nimen, kemiallisen kaavan ja CAS numeron mukaan. Haetut komponentit voidaan lisätä simulointia varten oikealla puolella olevaan laatikkoon klikkaamalla komponenttia, ja sen jälkeen klikkaamalla ikkunan keskellä olevaa nuolinäppäintä (>). Kaikki prosessiin liittyvät komponentit pitää lisätä simulaatioon ennen kuin se voidaan ajaa läpi realistisin tuloksin. (Chemstations, User Guide 6 2012, 136-138)



KUVIO 3. Kemiallisten ainesosien valinta

Prosessikaavion piirtämiseen tarvitaan yksikköoperaatioiden prosessilaitteita, syötevirtauksia ja tuotevirtauksia. Ohjelman oikeassa reunassa olevasta paletista (kuvio 3.) löytyvät edellä mainitut kohteet. (Chemstations, User Guide 7, 23-24)



KUVIO 4. Paletti yksikköoperaatioiden valintaan

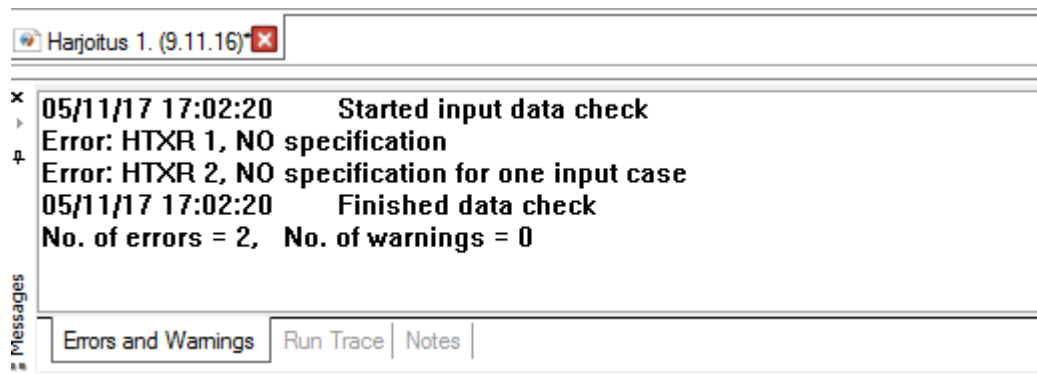
Kaikilla laitteilla ja virtauksilla on oma nimi ja kuvake, mistä tunnistaa minkä valita. Viemällä hiiren kuvakkeen päälle, ilmestyy kuvakkeen viereen kuvaus laitteesta. Jos näkyvillä olevista kuvakkeista ei löydy tarvittavaa, voi oikealla hiiren näppäimellä etsiä lisää vaihtoehtoja kuvakkeiden alta. Esimerkiksi kolonnin alta löytyy eritarkoituksiin käytettäviä kolonneja.

Kuvakkeen siirtäminen prosessikaavioon tapahtuu klikkaamalla kuvaketta, ja raahamalla se halutulle kohdalle työtilaa. Kaikki prosessin vaatimat laitteet ja virtaamat lisätään työtilaan, jonka jälkeen ne yhdistetään toisiinsa. Tämä tapahtuu klikkaamalla kuvakkeen tai virtauksen perässä olevaa punaista palloa, ja yhdistämällä se seuraavan virtauksen tai laitteen alussa olevaan siniseen palloon. Tämän jälkeen prosessikaaviossa on kaikki tarvittavat laitteet, syöte- ja tuotevirtaukset.

Seuraavaksi piirrettyihin virtauksiin lisätään niissä kulkevien ainesosien määrät, ja niiden olosuhteet. Tämä tapahtuu tupla klikkaamalla virtausta, jolloin näytölle aukeaa **Edit Streams** ikkuna. Tässä ikkunassa voidaan määrittää valitun virtauksen ominaisuudet, joiden avulla ohjelma simuloi prosessin. Termodynaamisista ominaisuuksista pitää määrittää lämpötilan, paineen ja höyryjakeen joukosta ainakin kaksi, jotta simulointi pystytään tekemään.

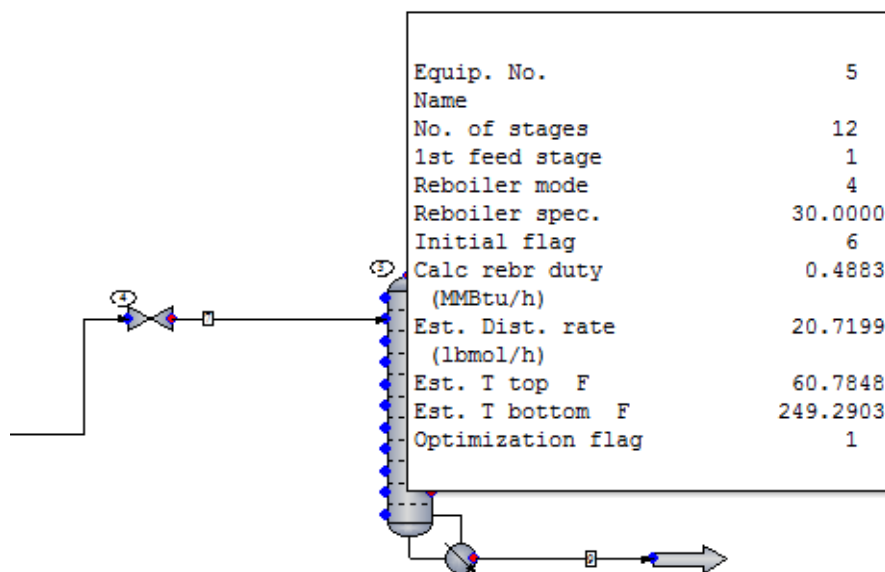
Virtausten määrittämisen jälkeen määritetään yksikköprosessien tekniset tiedot. Tämä tapahtuu tuplaklikkaamalla halutun yksikköprosessin kuvaketta. Tämän aukaisee **Edit UnitOps** ikkunan, jossa voidaan tehdä halutut määrittäykset laitteelle. Tässä ikkunassa vihreällä tekstillä olevat laatikot pitää olla täytetty, jotta prosessin simulointi onnistuu. Muut laatikot ovat tässä ikkunassa valinnaisia, mutta täytettynä tarkentavat simuloinnista saatavaa tulosta.

Simuloinnin läpi ajaminen on mahdollista tämän jälkeen, jos kaikki aikaisemmat vaiheet on tehty oikein. Tämä tapahtuu painamalla sinistä nuolta ohjelman yläosassa. Simuloinnin onnistuessa, ilmestyy ohjelman vasempaan alareunaan ilmoitus **Run finished**. Simuloinnin epäonnistuessa ilmestyy samaan laatikkoon ilmoitukset sen vioista ja puutteista (kuvio 4.). (Chemstations, User Guide 7, 52-63)



KUVIO 5. Simuloinnin infolaatikko.

Simuloinnin ajamisen jälkeen, jokaisesta virtauksesta ja prosessilaitteesta on mahdollista saada tietoa ja tuloksia. Laitteiden tulokset voidaan nähdä nopeasti viemällä hiiri halutun kuvakkeen päälle, jolloin hiiren viereen ilmestyy laatikko, josta nähdään laitteen tuloksia. (Chemstations, User Guide 7, 35)



KUVIO 6. Pikakatsaus

Kattavammat tulokset, ja itse tehdyt taulukot voidaan tehdä erilliselle välilehdelle, Excel tiedostoon tai tekstilaatikkoon, jonka voi asettaa prosessikaaviossa haluttuun paikkaan. Virtausten tai yksikköoperaatioiden tulosten esittäminen taulukossa prosessikaaviolla tapahtuu valikosta, **Format > Add Stream/Unit box**. Tämän jälkeen valitaan taulukkoon tulevat virtaukset ja yksikköoperaatiot, sekä niistä haluttavat tulokset.

Erilliselle välilehdelle tulokset saadaan valikosta **Report > Stream reports/Unit Ops reports**, jonka jälkeen valitaan tuloksiin haluttavat virtaukset tai yksikköoperaatiot.

Excel tiedostoon tulokset saadaan valikosta **Report > Spec Sheet**, jonka jälkeen valitaan halutut yksikköoperaatiot.

Simulointiohjelman kirjasto, eli DataBank saadaan auki valikosta **Thermophysical > Component database > View edit Database Component**. Tämän jälkeen aukeaa ikkuna, jossa voidaan suorittaa haku. Tämä tapahtuu samalla tavalla kuin Select Components kohdassa. Tämän jälkeen eteen aukeaa ikkuna, jonka avulla päästään valitsemaan valitun ainesosan tutkittavat tiedot, esimerkiksi viskositeetti. (Chemstations, User Guide 7, 94-98)

5 CHEMCAD HARJOITUKSIA

ChemCad-simulointiohjelmalle päivitettiin viisi erilaista harjoitusta. Opinnäytetyön alussa tehtävien tekeminen rajattiin tiettyihin yksikköoperaatioihin, nämä yksikköoperaatiot olivat kolonni, reaktori ja lämmönsiirrin. Näiden lisäksi päivitettiin Data Bank harjoitus ja tehtävä, missä sovelletaan kaikkia aikaisempia yksikköoperaatioita.

5.1 Kolonni

Hiilivetyseos (F) on jaettava/tislattava kahteen jakeeseen; D (distillate) ja B (bottom product).

Alla olevassa taulukossa on esitetty se piste, jossa kevyemmät hiilivedyt muodostavat tisleen, ja raskaammat hiilivedyt muodostavat pohjatuotteen. (n-C4 ja i-C5 ovat ”avainkomponentteja” joidenka kohdalla tapahtuu jako kahteen tuotteeseen, Chemcad-ohjelmassa key components).

TAULUKKO 1. Hiilivetyjen arvoja

	f_i <i>mol/s</i>	d_i <i>mol/s</i>	b_i <i>mol/s</i>
C3	5	-	-
i-C4	15	-	-
n-C4	25	24	1
i-C5	20	1	19
n-C5	35	-	-

Kolonniin tuleva syöttö on 10 bar paineessa ja 20 °C lämpötilassa. Jäähdytysveden lämpötila on 25 °C, poistolämpötila korkeintaan 45 °C ja $\Delta T_{ln} = n. 15 K$.

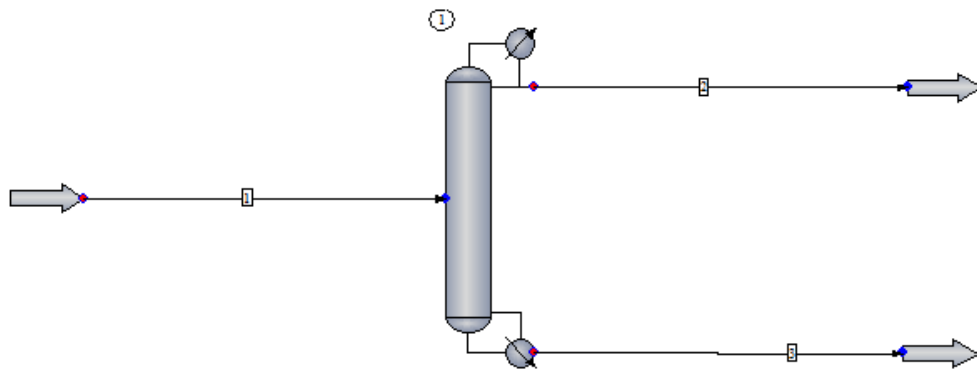
a. r / r_{min} :n ollessa 1,25 määriteltävä

- kolonnin paine
- minimipohjaluku
- teoreettinen pohjaluku
- pohjaluku pohjien hyötysuhteen ollessa $E_0 = 0,77$
- syöttöpohja

- lauhduttimen lämpövirta (kokonaislauhdutus)
- keittimen lämpövirta
- lämpötila lauhduttimen poistossa
- lämpötila keittimen poistossa

b. Valitaan viisi r/r_{\min} arvoa väliltä 1,25 - 2,25 (ei samaa arvoa, kun kohdassa a.) ja määritä

- pohjaluku, pohjien hyötysuhteen ollessa $E_0 = 0,77$
- syöttöpohja
- lauhduttimen lämpövirta (kokonaislauhdutus)



KUVIO 7. Kolonnitehtävän prosessikaavio

(Tabula, Simulontitehtävät, 2013)

5.2 Reaktori

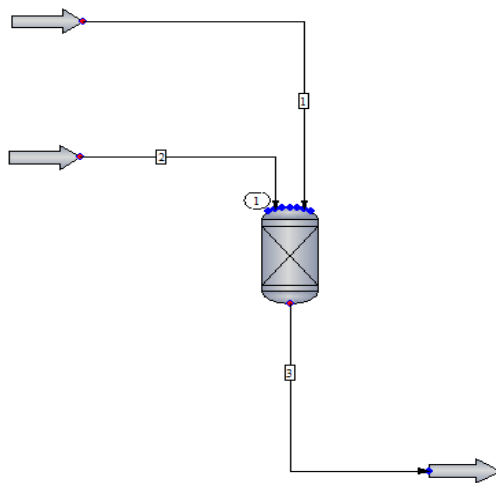
I-butaania poltetaan vajaalla ilmalla siten, että reaktorista poistuvan kaasuseoksen lämpötila on ? °C

Ilman koostumuksen voidaan olettaa olevan 21 *til-%* O₂ ja 79 *til-%* N₂, ilman paine on 7 *bar* ja lämpötila 80 °C.

I-butaani on kylläisenä höyrynä paineessa 2 *bar*.

Poistokaasun lämpötila on 1300 °C.

Kuinka suuri on hapen ainevirta (*kmol/kmol* butaania) reaktoriin?

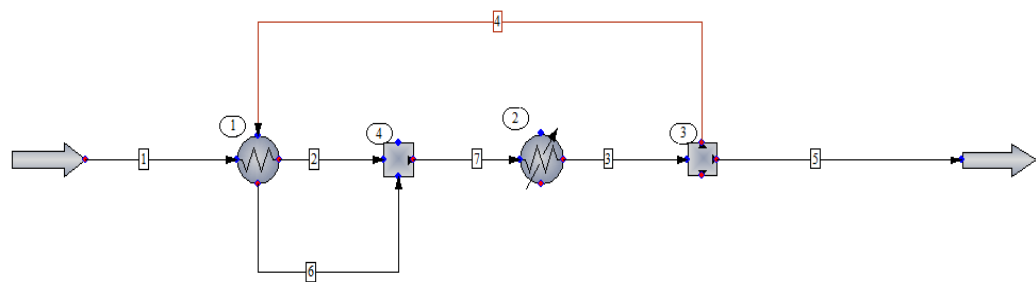


KUVIO 8. Reaktoritehtävän prosessikaavio
(Tabula, Simulontitehtävät, 2013)

5.3 Lämmönsiirrin

Lämmönsiirtimeen virtaa $10\text{ }^{\circ}\text{C}$ vettä 20000 kg/h ja sitä lämmitetään kylläisellä 2 bar höyryllä. Höyry saadaan seuraavasta veden höyrystysvaiheesta, 2700 kg/h . Kylläinen höyry lauhdutetaan, mutta ei jäähdytetä lämmönsiirtimellä. Lauhde liitetään höyrystimen syöttöön. Laitteiden painehäviöitä ei tarvitse ottaa huomioon.

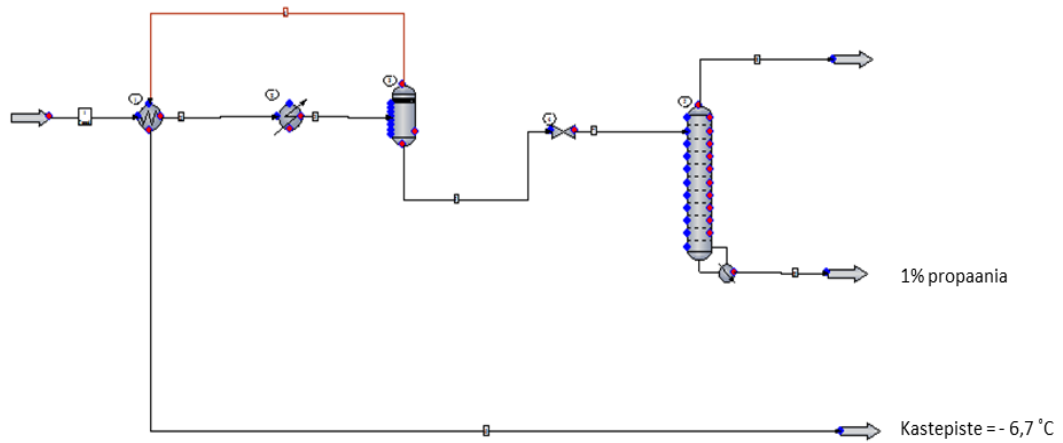
- Mikä on veden lämpötila lämmönsiirtimen jälkeen?
- Mikä on höyrystimen ottama lämpövirta?



KUVIO 9. Lämmönsiirrintehtävän prosessikaavio
(Tabula, Simulontitehtävät, 2013)

5.4 Prosessin simulointi harjoitus

Tässä harjoituksessa luodaan steady-state simulaatio. Alla olevassa kuvassa nähdään harjoituksen prosessikaavio (kuvio 9). Alapuolella on kirjattuna harjoituksen lähtöarvot.



KUVIO 10. Harjoituksen prosessikaavio

Syöte:	Lämmönsiirrin-1	Lämmönsiirrin-2
$T = 24\text{ °C}$	$P \text{ laskee } 1 = 0,35\text{ bar}$	$P \text{ laskee } = 0,35\text{ bar}$
$P = 13,8\text{ bar}$	$P \text{ laskee } 2 = 0,35\text{ bar}$	$T = -20,6\text{ °C}$
$N_2 = 45,45\text{ kmol/h}$	Höyryjää = 1,0	
$C_1 = 2043,65\text{ kmol/h}$		
$C_2 = 233,15\text{ kmol/h}$	Venttiili-1	Kolonne-1
$C_3 = 97,01\text{ kmol/h}$	$P = 8,6\text{ bar}$	12 tasoa
$iC_4 = 8,71\text{ kmol/h}$		Syöttö taso = 1
$nC_4 = 8,25\text{ kmol/h}$		Pohjatuote = $11,2\text{ (kg·mol)/h}$
$iC_5 = 11,97\text{ kmol/h}$		
$nC_5 = 6,35\text{ kmol/h}$		
$nC_6 = 6,35\text{ kmol/h}$		

Tehtävänä on määrittää uudet käyttöolosuhteet, sekä mahdolliset muutokset seuraavien vaatimusten mukaan:

- Prosessissa syntyvän hiilivety kaasun kastepisteen täytyy olla $-6,7\text{ }^{\circ}\text{C}$ tai alle. Hiilivedyn (Cricondetherm) kastepiste on korkein mahdollinen lämpötila, jossa kaksivaiheinen seos esiintyy yhdessä. Virtauksen sisältö ei tiivisty, niin kauan kuin virtauksen lämpötila pysyy (Cricondetherm) kastepisteen yläpuolella.
- Pohjatuote voi maksimissaan sisältää 1% propaania.

(Chemstations, User Guide 6 2012, 132)

5.5 DataBank

1.

Etsi kirjallisuudesta veden tiheys lämpötilan funktiona, ja vertaa näin saatua veden tiheyttä DataBank:in kirjastosta saatavasta yhtälöstä laskettuun tiheyteen (yhtälöt lämpötilasta riippuville ominaisuuksille).

Lämpötila esim. 4 °C

Etsi kirjallisuudesta veden viskositeetti lämpötilan funktiona, ja vertaa näin saatua veden viskositeettia DataBank:in kirjastosta saatavasta yhtälöstä laskettuun viskositeettiin (yhtälöt lämpötilasta riippuville ominaisuuksille).

Lämpötila esim. 0 °C

2.

a. Missä paineessa puhdas tolueeni kiehuu, jos lämpötila on 149 °C?

b. Esiintyykö puhdas tolueeni nesteenä vai kaasuna 149 °C ja 3,5 bar?

c. Esiintyykö puhdas tolueeni nesteenä vai kaasuna 227 °C ja 10 bar?

3.

60 mol-% metanolia ja 40 mol-% etanolia sisältävä seos on lämpötilaltaan 72 °C. Millä välillä (esim. 2 bar – 10 bar) seoksen paineen on oltava, jotta seos on kokonaan höyryä, nestettä tai kaksivaiheinen (kaasu/neste) systeemi?

4.

Virtaus joka koostuu 60 % 1-penteenistä ja 40 % 1-heptaanista on 2 bar paineen vaikutuksen alaisena. Tämä virtaus leimahtaa päästyään 90 °C asteeseen, ja siitä syntyvä neste leimahtaa uudestaan päästyään 90 °C asteeseen ja saavuttaessaan 1 bar paineen. Mikä on nesteen koostumus toisen leimahduksen jälkeen? Kuinka iso osa alkuperäisestä heptaanista esiintyy tässä virtauksessa?

(Tabula, Simulontitehtävät, 2013)

6 TULOSTEN KÄSITTELY

Seuraavassa on esitettyä edellä mainittujen tehtävien tulokset. Tulosten käsittelyssä käydään läpi päivitettyjen tehtävien tuloksia. Tämän tarkoituksena on tukea tehtävien tarkastajaa.

6.1 Kolonni

Simuloimalla Kolonni tehtävä ChemCad-simulointiohjelmalla saavutettiin seuraavat tulokset:

a.

- kolonnin paine = 7,1 *bar*
- minimipohjaluku = 10
- teoreettinen pohjaluku = 22
- pohjaluku pohjien hyötysuhteen ollessa ($E_0 = 0,77$) = 17
- syöttöpohja = 11
- lauhduttimen lämpövirta (kokonaislauhdutus) = -528 *kcal/s*
- keittimen lämpövirta = 779 *kcal/s*
- lämpötila lauhduttimen poistossa = 52 °C
- lämpötila keittimen poistossa = 103 °C

b.

TAULUKKO 2. Simuloinnin tulokset

r/r_{min}	Pohjaluku ($E_0=0,77$)	Syöttöpohja	Lauhduttimen lämpövirta (<i>kcal/s</i>)	Keittimen läm- pövirta (<i>kcal/s</i>)
1,25	17	11	-528	779
1,5	14	10	-593	844
1,75	13	9	-657	908
2	12	8	-722	9,73
2,5	11	8	-787	1038

Kolonnitehtävän vastaukset löytyvät alla olevista taulukoista ja kuviosta.

TAULUKKO 3. Kolonni tehtävän virtausten simulontitulokset

Stream No.	1	2	3
Name			
-- Overall --			
Temp C	20.0000	52.1099	103.2108
Pres bar	10.0000	7.1000	7.1000
Enth MJ/s	-16.334	-6.5027	-8.7809
Vapor mole fraction	0.0000	0.0000	0.0000
Molar flow gmol/s	100.0000	45.2713	54.7287
Mass flow g/s	6513.6499	2579.9875	3933.6626
Std liq m ³ /h	38.8442	16.2621	22.5821
Std vap 0 C m ³ /h	8068.9136	3652.9004	4416.0122
Flow rates in g/s			
Propane	220.4800	220.4772	0.0028
I-Butane	871.8450	867.7620	4.0830
N-Butane	1453.0750	1394.9519	58.1230
I-Pentane	1443.0000	72.1500	1370.8501
N-Pentane	2525.2500	24.6461	2500.6040

TAULUKKO 4. Kolonnin simulointitulokset

Equip. No.	1
Name	
Mode	2
Light key component	3.0000
Light key split	0.9600
Heavy key component	4.0000
Heavy key split	0.0500
R/Rmin	1.2500
Number of stages	21.9529
Min. No. of stages	10.2931
Feed stage	11.1125
Condenser duty MJ/s	-2.2116
Reboiler duty MJ/s	3.2619
Colm pressure bar	7.1000
Reflux ratio, minimum	1.2690
Calc. Reflux ratio	1.5862
Number of points	5
Lower bound R/Rmin	1.2500
Upper bound R/Rmin	2.2500

EQUIPMENT SUMMARIES

Shortcut Distillation Summary

Equip. No.	1
Name	
Mode	2
Light key component	3.0000
Light key split	0.9600
Heavy key component	4.0000
Heavy key split	0.0500
R/Rmin	1.2500
Number of stages	21.9529
Min. No. of stages	10.2931
Feed stage	11.1125
Condenser duty kcal/s	-528.2405
Reboiler duty kcal/s	779.0887
Colm pressure bar	7.1000
Reflux ratio, minimum	1.2690
Calc. Reflux ratio	1.5862
Number of points	5
Lower bound R/Rmin	1.2500
Upper bound R/Rmin	2.2500

Shortcut Distillation # 1 Case Studies:

R/Rmin	Reflux ratio	No. of stgs	Feed stg	Qcond kcal/s	Qreb kcal/s
1.25	1.59	22.0	11.1	-5.282E+002	7.791E+002
1.50	1.90	18.5	9.5	-5.930E+002	8.442E+002
1.75	2.22	16.7	8.6	-6.578E+002	9.086E+002
2.00	2.54	15.6	8.0	-7.224E+002	9.737E+002
2.25	2.86	14.8	7.7	-7.875E+002	1.038E+003

KUVIO 11. Tislauksen yhteenveto

6.2 Reaktori

Simuloimalla Reaktoritehtävä ChemCad-simulointiohjelmalla saavutettiin seuraavat tulokset:

Hapen ainevirta reaktoriin on 1,274 *kmol/kmol* I-butaania. Typen ainevirta reaktoriin on 5,135 *kmol/kmol* I-butaania. Poistokaasun lämpötila on 1300,4 °C.

Reaktori tehtävän vastaukset saadaan alla olevasta taulukosta.

TAULUKKO 5. Reaktori tehtävän virtausten mittaustulokset

Stream No.	1	2	3
Name			
-- Overall --			
Temp C	6.6165	80.0000	1300.4381
Pres bar	2.0000	7.0000	7.0000
Enth kcal/h	-3.2552E+006	2.4156E+005	-3.0136E+006
Vapor mole fraction	1.000	1.000	1.000
Molar flow kmol/h	100.0000	640.9000	770.3000
Mass flow kg/h	5812.3003	18461.8613	24274.1328
Std liq m3/h	10.3220	21.4170	32.0378
Std vap 0 C m3/h	2241.3647	14364.9063	17265.2324
Flow rates in kg/h			
I-Butane	5812.3003	0.0000	4673.0894
Nitrogen	0.0000	14385.1895	14385.1895
Oxygen	0.0000	4076.6729	0.0000
Carbon Dioxide	0.0000	0.0000	3450.3840
Water	0.0000	0.0000	1765.4700

6.3 Lämmönsiirrin

Simuloimalla Lämmönsiirrintehtävä ChemCad-simulointiohjelmalla saavutettiin seuraavat tulokset:

- 81 °C
- 53285 MJ/h = 14,8 MW

Lämmönsiirrin tehtävän tulokset saadaan alla olevista taulukoista.

TAULUKKO 6. Lämmönsiirrin tehtävän virtausten mittaustulokset

Stream No.	1	2	3	4	5	6	7
Name							
-- Overall --							
Temp C	10.0000	81.0384	120.2127	120.2127	120.2127	120.2120	85.7038
Pres bar	1.0000	1.0000	2.0000	2.0000	2.0000	2.0000	2.0000
Enth MJ/h	842.35	6787.0	61435.	7307.3	54128.	1362.7	8149.6
Vapor mole fractio	0.0000	0.0000	1.000	1.000	1.000	1.000E-006	0.0000
Molar flow kmol/h	1110.1860	1110.1860	1260.0612	149.8751	1110.1860	149.8751	1260.0612
Mass flow kg/h	20000.0000	20000.0000	22700.0000	2700.0000	20000.0000	2700.0000	22700.0000
Std liq m3/h	20.0000	20.0000	22.7000	2.7000	20.0000	2.7000	22.7000
Std vap 0 C m3/h	24883.3184	24883.3184	28242.5645	3359.2478	24883.3184	3359.2478	28242.5645
Flow rates in kg/h							
Water	20000.0000	20000.0000	22700.0000	2700.0000	20000.0000	2700.0000	22700.0000

TAULUKKO 7. Lämmönsiirtimen mittaustulokset

Equip. No.	2
Name	
1st Stream VF Out	1.0000
Calc Ht Duty MJ/h	53285.4844
LMTD Corr Factor	1.0000
1st Stream Pout bar	2.0000
P1 out specied bar	2.0000

6.4 Prosessin simulointi harjoitus

Harjoituksen simuloinnin jälkeen prosessissa syntyvän kaasun pitää olla lämpötilaltaan $-6,7\text{ }^{\circ}\text{C}$ tai alle, ja stabiloitu lauhde saa sisältää maksimissaan 1 % propaania.

TAULUKKO 8. Harjoituksen virtausten mittaustulokset

Virtauk- sen nro.	1 (<i>kmol/h</i>)	2	3	4	5	6	7	8	9
Typpi	45,5	45,5	45,5	45,5	45,5	0,0	0,0	0,0	0,0
Metaani	2043,7	2043,7	2043,7	2041,6	2041,6	2,1	2,1	2,1	0,0
Etaani	233,2	233,2	233,2	231,5	231,5	2,1	2,1	2,1	0,0
Propaani	97,1	97,1	97,1	93,1	93,1	4,0	4,0	4,0	0,0
I-Butaani	8,7	8,7	8,7	7,7	7,7	1,0	1,0	1,0	0,0
I-Pentaani	12,0	12,0	12,0	7,3	7,3	4,7	4,7	1,0	3,7
N-Butaani	8,3	8,3	8,3	6,9	6,9	1,4	1,4	1,3	0,0
N-Pen- taani	6,4	6,4	6,4	3,3	3,3	3,1	3,1	0,5	2,6
N-Hek- saani	6,4	6,4	6,4	1,3	1,3	5,1	5,1	0,2	4,9

7 YHTEENVETO

Opinnäytetyön alussa tavoitteiksi asetettiin tiiviin suomenkielisen käyttöohjeen tuottaminen ja opintomateriaalin päivittäminen simulointiohjelmalle. Molempien tarkoitus oli tukea opetusta Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen -opintojaksolla.

Alussa asetettuihin tavoitteisiin ei valitettavasti täysin päästy. Käyttöohjeesta saatiin kompakti ja selvä kokonaisuus, joten tässä osuudessa onnistuttiin. Onnistumisen laatu nähdään kuitenkin vasta, kun käyttöohje otetaan opintojaksolla käyttöön. Opintomateriaalin päivittäminen osoittautui haastavaksi. Aikataulu oli turhan tiukka työmäärään nähden, ja osittain tämän takia ei simulointiharjoitusten päivittämiseen ehditty panostamaan tarpeeksi. Tehtäviä saatiin päivitettyä, mutta tästä saatu hyöty ei ole tavoitteiden tasolla.

Simulointiharjoituksia voitaisiin kehittää vielä paljon pidemmälle. Niitä voitaisiin yhdistää opintojakson aikana suoritettavien mitoitustehtävien kanssa ja näin saataisiin yhdistettyä kaksi eri osa-aluetta yhteen.

LÄHTEET

Chemstations, Content, CHEMCAD Version 6 User Guide 2012. Luettu 25.5.2017
http://www.chemstations.com/content/CHEMCAD_6_User_Guide_2012.pdf

Chemstations, Content, CHEMCAD Version 7 User Guide. Luettu 25.5.2017
http://www.chemstations.com/content/documents/CHEMCAD_7_User_Guide.pdf

Chemstations, Products, What is CHEMCAD? Luettu 29.5.2017 http://www.chemstations.com/Products/What_is_CHEMCAD/

Tabula, Tehdassuunnittelun ja prosessien mallintaminen, Simulointitehtävät, 2013.

TAMK, Opetussuunnitelmat, Biotuote- ja prosessitekniikan koulutus, Tehdassuunnittelu ja prosessien mallintaminen. Luettu 25.5.2017. <http://opinto-opas-ops.tamk.fi/index.php/fi/167/fi/13249/161575/949/year/2017>

